

学校编码: 10384  
学号: 33120121152659

分类号\_\_密级\_\_  
UDC\_\_

厦 门 大 学

硕 士 学 位 论 文

基于选择编码的超快速磁共振波谱方法及  $Z^2$  梯度  
线圈初步设计

Selective Encoding Based Ultrafast NMR Spectroscopy  
and Preliminary Design of the  $Z^2$  Gradient Coil

胡 浩

指导教师姓名: 林雁勤 副教授

孙惠军 高级工程师

专 业 名 称: 电子与通信工程

论文提交日期: 2015 年 4 月

论文答辩时间: 2015 年 5 月

学位授予日期: 2015 年 月

答辩委员会主席: \_\_\_\_\_

评 阅 人: \_\_\_\_\_

2015 年 月

厦门大学博硕士论文摘要库

## 厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为(核磁共振)课题(组)的研究成果,获得(核磁共振)课题(组)经费或实验室的资助,在(核磁共振)实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

## 厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（        ） 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，  
于        年        月        日解密，解密后适用上述授权。

（    ☒    ） 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年        月        日

厦门大学博硕士论文摘要库

# 目 录

中文摘要 .....	i
ABSTRACT.....	iii
<b>第一章 绪论 .....</b>	<b>1</b>
1.1 引言 .....	1
1.2 核磁共振基本原理及发展概况.....	1
1.2.1 原子核自旋.....	1
1.2.2 磁共振原理.....	2
1.2.3 核磁共振的发展及应用.....	3
1.3 空间编码单扫描二维谱技术简介.....	4
1.3.1 二维谱.....	4
1.3.2 空间编码方法简介.....	6
1.4 论文结构.....	8
<b>第二章 基于选择编码的超快速磁共振波谱方法.....</b>	<b>13</b>
2.1 引言 .....	13
2.2 理论部分 .....	15
2.2.1 相关谱.....	15
2.2.2 Chirp 脉冲 .....	20
2.2.3 恒时相位与实时相位编码 COSY 谱.....	23
2.2.4 多色组合软脉冲.....	27
2.2.5 新序列图及算符推导.....	28
2.3 结果与讨论 .....	32
2.3.1 仪器及样品.....	32
2.3.2 混合溶液实验.....	32
2.3.3 玉米油实验.....	35
2.3.4 与 Hadamard 方法的比较.....	36
2.4 小结 .....	36
<b>第三章 <math>Z^2</math> 梯度线圈.....</b>	<b>39</b>

3.1 引言 .....	39
3.2 梯度线圈的设计方法 .....	40
3.2.1 麦克斯韦线圈法.....	40
3.2.2 分离导线法.....	41
3.2.3 目标场法.....	41
3.3 500M 超导谱仪 $Z^2$ 梯度线圈设计 .....	44
3.3.1 梯度线圈的设计理论.....	44
3.3.2 单个圆线圈的空间磁场分布.....	47
3.3.3 线圈具体设计与仿真.....	51
3.3.4 注意事项.....	60
3.4 本章小结 .....	62
第四章 总结和展望 .....	65
4.1 总结 .....	65
4.2 展望 .....	66
致谢.....	67
论文发表情况 .....	69



## CONTENTS

<b>Chinese Abstract .....</b>	<b>i</b>
<b>English Abstract.....</b>	<b>iii</b>
<b>Chapter 1 Preface .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Introduction .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Basic principles of NMR and overview of NMR development .....</b>	<b>1</b>
1.2.1 Spin of the nucleus.....	1
1.2.2 Principles of NMR .....	2
1.2.3 Development and application of NMR .....	3
<b>1.3 Spatially encoded single-scan 2D NMR spectroscopy .....</b>	<b>4</b>
1.3.1 Two-dimensional NMR spectroscopy.....	4
1.3.2 The spatially encoded technique .....	6
<b>1.4 Structure of this dissertation .....</b>	<b>8</b>
<b>Chapter 2 Selective encoding based ultrafast magnetic resonance spectroscopy.....</b>	<b>13</b>
<b>2.1 Introduction.....</b>	<b>13</b>
<b>2.2 Theory part.....</b>	<b>15</b>
2.2.1 Correlated spectroscopy .....	15
2.2.2 Chirp pulse .....	20
2.2.3 Constant-time phase and real-time phase encoding COSY spectroscopy.....	23
2.2.4 Polychromatic pulses .....	27
2.2.5 The proposed new sequence and product operator deduction for it ...	28
<b>2.3 Results and discussion .....</b>	<b>32</b>
2.3.1 Instruments and samples .....	32
2.3.2 Mixed solution experiment .....	32
2.3.3 Corn oil experiment .....	35
2.3.4 Comparison with the Hadamard method .....	36

2.4 Conclusions.....	36
<b>Chapter 3 <math>Z^2</math> gradient coil.....</b>	<b>39</b>
3.1 Introduction.....	39
3.2 Designing methods of gradient coils.....	40
3.2.1 Maxwell coils method.....	41
3.2.2 Split wire method.....	41
3.2.3 Target-field method.....	41
3.3 Designing the $Z^2$ gradient coil for a 500M superconducting spectrometer .....	44
3.3.1 Design theory of the gradient coils .....	44
3.3.2 Magnetic field distribution of a single round coil.....	47
3.3.3 Coil specific design and simulation .....	51
3.3.4 Precautions .....	60
3.4 Conclusions.....	62
<b>Chapter 4 Summary and prospect.....</b>	<b>65</b>
4.1 Summary.....	65
4.2 Prospect.....	66
<b>Acknowledgements .....</b>	<b>67</b>
<b>Publications .....</b>	<b>69</b>

**作者姓名：**胡浩

**论文题目：**基于选择编码的超快速磁共振波谱方法及  $Z^2$  梯度线圈初步设计

**作者简介：**胡浩，男，1987 年 7 月出生，2012 年 09 月师从于厦门大学林雁勤副教授和孙惠军高级工程师，于      年      月获硕士学位。

## 中文摘要

核磁共振（NMR）波谱技术是当今最有力的谱学工具之一，在化学、生物、医药等众多领域获得重要而广泛的应用。2002 年 Frydman 小组提出的基于空间编码的快速采样方法，大大增强了高维磁共振波谱的采样效率。在某一些应用体系中，存在若干个谱峰的强度远超于其他谱峰的情况，很容易由于动态增益不足而检测不到某些较弱的谱峰，而往往这些较弱的谱峰包含着感兴趣的信息。另外，在实际的化学生物应用中，存在选择性感兴趣检测的情况，即只需要选择性地观察若干个具有标记作用的谱峰。由于空间编码技术借助于高速切换的双极性梯度来完成解码，因而无法选择性地检测若干个非连续的频点。为解决以上两个问题，本文中提出一种基于选择编码的空间编码方法，即在序列中施加选择性脉冲，选择性破坏某些谱峰的编码过程，使之不能在解码期解码，从而简化谱图，实现选择性压制或者非连续频点的感兴趣检测。如果把选择性反转脉冲换为硬反转脉冲加选择性反转脉冲，则最终的谱图中只出现被选择性脉冲选中的谱峰。理论分析及相关的实验验证了这种方法的可行性和有效性。空间编码技术把化学位移信息通过线性梯度转化为 sinc 形状的回波，是空间编码技术加速的关键，也是分辨率不足的来源。为保证空间编码技术的采样效率且同时提高间接维分辨率，故引入  $Z^2$  梯度，并对  $Z^2$  梯度线圈采用改进的麦克斯韦线圈对方法进行了设计与仿真。

**关键词：**核磁共振；选择编码； $Z^2$  梯度

厦门大学博硕士论文摘要库

# Selective Encoding Based Ultrafast NMR Spectroscopy and Preliminary Design of the $Z^2$ Gradient Coil

Hu Hao

## ABSTRACT

Nuclear Magnetic Resonance (NMR) spectroscopy serves as one of most powerful analytical tools nowadays. It has been widely applied in chemistry, biology and medicine. The ultrafast spatiotemporal encoding method proposed by Frydman et al. in 2002 largely enhanced the sampling efficiency of multi-dimensional NMR spectroscopy. In some applications, there may be several spectral peaks whose intensities are far stronger than others, and thus some weak peaks can't be readily detected due to the limited dynamic range. These peaks usually contain information of interest. In practical chemical and biological applications, we often come across situations where only some selected peaks are of interest, e. g. peaks from labeled nuclei. Due to the bipolar gradient at high slew rate in the spatiotemporal encoding technique during decoding stage, non-continuous discrete frequency points can't be selectively detected. In order to solve above two problems, this study puts forward a selective spatiotemporal encoding method. It utilizes a selective pulse to selectively destroy encoding processes of certain resonances. So it can be used to simplify the spectrum and realize selective suppressions or detect non-continuous discrete frequency points of interest. If the selective reverse pulse is replaced by a hard reverse pulse along with a selective reverse pulse, the spectrum finally only has spectral peak which has been selected by the selective pulse. Theoretical analyses and related experiments have proved the feasibility and validity of this method. The chemical shift information is converted to a sinc shape echo by the linear gradient which is the key technology to accelerate of the spatiotemporal encoding, and is also the source of the resolution insufficiency. For improving the spectral resolutions in spatially-encoded dimensions while preserving the acquisition efficiency, the concept of spatiotemporal encoding with  $Z^2$  gradient is proposed. Then we use an improved

method of Maxwell coil to design and simulate of the  $Z^2$  gradient coil.

**Keywords:** nuclear magnetic resonance; selective encoding;  $Z^2$  gradient

厦门大学博硕士论文摘要库

# 第一章 绪论

## 1.1 引言

核磁共振(Nuclear Magnetic Resonance, NMR)是指处于外界静磁场中的非零磁矩的原子核在外界射频(Radio Frequency, RF)场的作用下, 当其拉莫尔进动频率与射频场频率相等时, 核自旋简并能级发生塞曼分裂, 发生的吸收电磁波的物理现象<sup>[1,2]</sup>。核磁共振最开始主要用来对各种原子核的磁矩进行精确测定。后来发现了“化学位移”现象, NMR 技术就发展成为研究物质分子化学结构的重要手段之一。1964 年后, 磁场超导化的实现以及脉冲傅里叶变换技术(Pulse Fourier Transform, PFT)的提出, 使 NMR 谱仪技术得到革命性的提高。1973 年, Lauterbur 把线性梯度磁场技术引入 NMR 谱仪进行空间编码, 首次得到了一幅二维磁共振图像, 为核磁共振成像(Nuclear Magnetic Resonance Imaging, NMRI)这门学科的诞生奠定了基础, 揭开了磁共振成像技术应用到医学上的序幕。由于名称中带核, 怕引起人们的不安, 此后被简称为 MRI。之后 NMR 技术随着半个多世纪的深入研究和快速发展, 它已经发展成为一门综合性的学科, 在物理、化学、生物、工业、农业及医药等领域得到广泛应用。NMR 技术迄今在物理、生物、化学及医学领域已经获得了 5 次诺贝尔奖, 可谓硕果累累, 现在已成为物理学、化学、生物及医药等领域应用最广泛且最有力的工具之一。

## 1.2 核磁共振基本原理及发展概况

### 1.2.1 原子核自旋

大家都知道分子由原子构成, 而原子核和电子又组成了原子。原子核中质子带正电荷, 中子不带电, 所以原子核表现为带正电, 且电荷数等于质子数。由于原子核本身不是静止的, 存在类似电子的自旋运动, 所以在自旋运动作用下, 带电的原子核在绕某个轴旋转时就会产生核磁矩。且这个核磁矩  $\mu$  正比于自旋角动量  $p$ , 即  $\mu = \gamma p$ , 式子中  $\gamma$  为对应的原子核的旋磁比, 是原子核的重要属性。根据量子力学知识我们知道, 原子核的自旋角动量是量子化的, 不能随便取值, 在量子力学中用自旋量子数  $I$  来表示<sup>[3]</sup>, 即:

$$|p| = \hbar \sqrt{I(I+1)} \quad (1.1)$$

式中  $\hbar = h/2\pi$  (其中  $h$  为普朗克常量)。自旋量子数  $I$  的值是由原子核中的质子数  $Z$  和中子数  $N$  来决定的。若质子数  $Z$  为偶数且中子数  $N$  也是偶数, 此时  $I=0$ , 原子核称为非磁性核, 如  $^{12}\text{C}$ 、 $^{16}\text{O}$ , 不产生自旋角动量, 没有 NMR 信号产生。当  $Z$  为奇数且  $N$  也为奇数时,  $Z+N=$  偶数, 此时  $I$  为整数值; 当  $Z+N=$  奇数时,  $I$  为半整数, 这两类原子核均能产生 NMR 信号。 $I=1/2$  的原子核, 其电荷呈均匀球形分布于原子核表面, 这样的原子核不具有四极矩, 此种情况形成的谱线线型比较窄, 是最理想的 NMR 检测状态。目前常用的  $^1\text{H}$ 、 $^{13}\text{C}$ 、 $^{15}\text{N}$ 、 $^{19}\text{F}$ 、 $^{31}\text{P}$  等基本元素的自旋量子数均为  $1/2$ , 是 NMR 主要的研究对象, 被用来对有机化合物的结构进行测定。

### 1.2.2 磁共振原理

当把样品放到一个均匀的外部静磁场 (称为主磁场) 中, 原子核本身的自旋作用使得它在磁场中自旋进动。并且此时样品的核磁矩形成有序排列, 与主磁场方向同向。对外形成了宏观磁矩, 可以被检测到。核自旋的这种有序排列, 共有  $2I+1$  种排列方式, 一般用磁量子数  $m$  来表示,  $m$  只能取  $I, I-1, I-2, \dots, -I$  等值。

排列方向不同时原子核的能量不同。对于  $^1\text{H}$  来说, 它的自旋量子数  $I=1/2$ , 磁量子数  $m=1/2$  (低能态, 与主磁场同向) 或者  $m=-1/2$  (高能态, 与主磁场反向), 只有两种自旋取向。当能级发生分裂时, 其产生的能级差为

$$\Delta E = 2\mu H_0 = \gamma \hbar H_0 = \frac{\gamma h}{2\pi} H_0, \quad H_0 \text{ 为主磁场强度。在垂直于主磁场的方向上施加}$$

一特定频率的射频脉冲激励, 核磁矩发生翻转, 能级发生变化<sup>[4]</sup>, 吸收了能量的低能态原子核足够跃迁到高能态, 但是原子核高能态不稳定, 最后又会恢复到平衡态, 并产生共振信号, 把这些采集到的共振信号进行相应的数据处理, 就能得到我们熟悉的谱峰图。经过射频脉冲的激励作用, 核磁矩和外磁场之间有一个倾斜角, 使得原子核围绕外磁场的方向回旋, 犹如在重力场中运动的陀螺, 我们把这种运动方式称为拉莫进动。原子核的旋磁比  $\gamma$  跟主磁场磁感应强度  $B_0$  共同决定



Degree papers are in the “[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)”.

Fulltexts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to [etd@xmu.edu.cn](mailto:etd@xmu.edu.cn) for delivery details.